

## Numerische Modellierung

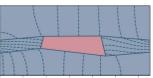
### Simulationscode TransPyREnd

Für die Untersuchungen entwickelt die BGE einen Simulationscode, welcher die Simulation der folgenden Prozesse in 1D ermöglicht:



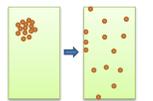
#### Radioaktiver Zerfall

unabhängig von Materialeigenschaften, es stehen geeignete Modellierungsmethoden zur Verfügung.



#### Advektiver Transport

abhängig von Randbedingungen, wenige Daten und variabel über den Betrachtungszeitraum von 1 Mio. Jahren.



#### Diffusiver Transport mit Sorption

materialabhängig, Daten sind (mit Ungewissheiten) verfügbar und über den Betrachtungszeitraum von 1 Mio. Jahre relativ unveränderlich.

$$\phi R_i \frac{\partial c_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{e,i} \frac{\partial c_i}{\partial x} - q c_i \right) + \sum_j \phi c_i R_i \lambda_{i,j} - \phi c_i R_i \Lambda_i$$

$i$  - Index einer Spezies,  $j$  - Index der anderen Spezies,  $\lambda_{i,j}$  - Zerfallsrate von Nuklid  $j$  zu  $i$  ( $s^{-1}$ ),  $\Lambda$  - Gesamtzerfallsrate von Nuklid  $i$  ( $s^{-1}$ ),  $q$  - Darcy-Geschwindigkeit ( $m s^{-1}$ ),  $\phi$  - Porosität (-),  $c$  - Konzentration ( $mol m^{-3}$ )

Die Lösung erfolgt mittels des Finiten-Differenzen-Verfahrens unter Verwendung eines impliziten Löser erster Ordnung (Unterstützung für semi-implizites Crank-Nicolson-Verfahren ist in Umsetzung)



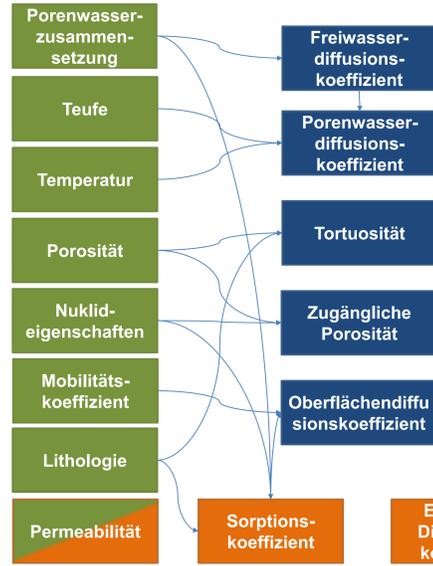
**Zerfallsprozess nach Larue et al., 2013 (GRS289):** Initiales Radionuklidinventar, Zerfallsketten Th, Np, U, Ac sowie einzelne Aktivierungsprodukte.

**Berücksichtigung nur langlebiger Nuklide** zur Optimierung des numerischen Aufwandes. *Finale Vorgehensweise und Anforderungen sind in der Erarbeitung*

Codeentwicklung in Python; Offenlegung unter Open Source Lizenz ist geplant. Es erfolgen weiterhin Benchmarks mit anderen Codes (OpenGeoSys, FEFLOW) sowie Verifikationen mit analytischen Lösungen.

## Parametrisierung

### Bestimmung von Transportparametern



Modellparameter sind meist nicht direkt bekannt, sondern leiten sich aus anderen (messbaren) Material- und Nuklideigenschaften ab. Es ergeben sich Ketten von Rechenvorschriften oder Korrelationen, nach welchen pro Nuklid die messbaren Größen über Zwischengrößen in Modellparameter übersetzt werden. Am Ende entsteht ein untersuchungsraum-spezifischer Parametersatz für alle Nuklide und Lithologien.

Abb. 1: Parameterwertkette, Beispiel basierend auf Arbeit der NAGRA. Grün: messbare Eingangsgrößen, Blau: Zwischengrößen, Orange: Modellparameter.

## Sampling

### Erstellung von A-priori Parameter Ensembles

Parameterwerte (messbare Eingangsgrößen, Zwischengrößen und Modellparameter) sind mit Ungewissheiten behaftet. Die Ungewissheiten werden während des Arbeitsablaufes nachverfolgt. Anstelle eines konkreten Wertes wird mit Wertebereichen gearbeitet, aus diesen werden pseudo-randomisierte (LH) Ensembles erstellt.

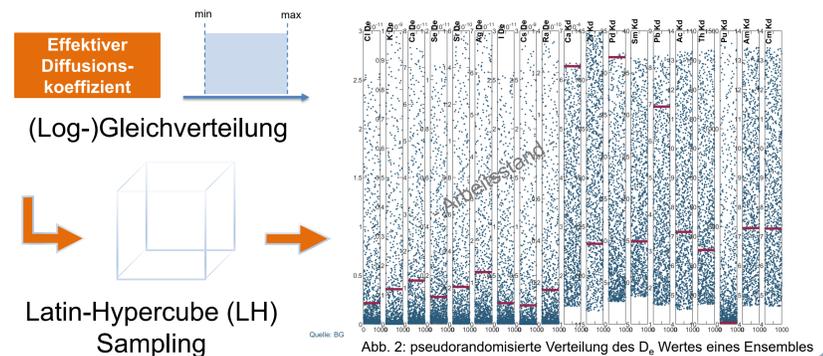


Abb. 2: pseudorandomisierte Verteilung des  $D_e$  Wertes eines Ensembles

## Auswertung

### Berechnung der Transportlänge

Die Transportlänge stellt die Entfernung vom Endlagerbereich dar, innerhalb welcher nach 1 Mio Jahre 99,99% der Nuklide zurückgehalten werden. Sie erlaubt eine Aussage über das in der EndlSiAnV geforderte Einschlussvermögen des Gebietes.

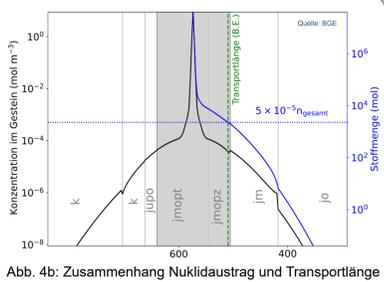
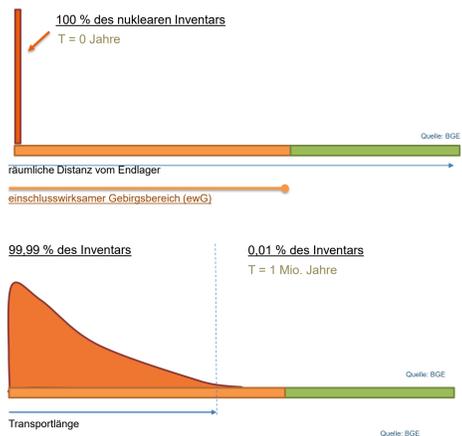


Abb. 4b: Zusammenhang Nuklidaustrag und Transportlänge

**Kennzahl  $I_M$**

$$I_M = \frac{d_{min}}{d_{1Ma}}$$

$d_{min}$  - Minimaler Abstand zwischen Endlagerrand und Rand des Wirtsgesteins  
 $d_{1Ma}$  - Berechnete Transportlänge: Distanz vom Endlagerrand, in der die Grenzwerte eingehalten werden

**Kennzahl für den sicheren Einschluss**

## Ungewissheitsanalyse

### Varianz der Transportlänge

Die numerische Berechnung erfolgt für jedes Ensemblemitglied. Die sich aus den Ungewissheiten der Eingangsparameter ergebenden Vorhersageungewissheiten lassen sich somit aus der Varianz der Ergebnisse berechnen. Es fallen hierbei große Datenmengen an, welche zunächst agglomeriert und zu Kennzahlen und Grafiken aufbereitet werden. Zentral ist hierbei wiederum die Transportlänge zur Einschätzung der Eignung eines Gebiets bzgl. des geforderten Einschlussvermögens [1]. Aus der Varianz der Kennzahl  $I_M$  wird eine zweite Kennzahl  $I_R$  berechnet, welche ein Maß der Robustheit ist.

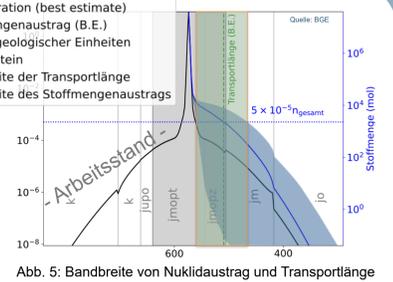


Abb. 5: Bandbreite von Nuklidaustrag und Transportlänge

**Kennzahl  $I_R$**

$$I_R = P(I_M > 1)$$

$P(I_M > 1)$  - Anteil der Rechenläufe für die gilt, dass  $I_M > 1$  erfüllt ist

**Kennzahl für Robustheit**